

# 线型优化最大熵光谱估计方法中自回归模型 两种求解方法的比较

高晓峰, 徐之海\*

浙江大学现代光学仪器国家重点实验室, 浙江 杭州 310027

**摘要** 在光谱分辨率增强技术中, 线型优化最大熵谱估计方法 LOMEE(line shape optimized maximum entropy spectral estimation)是指通过傅里叶自退卷积技术消除光谱谱线线型对干涉图的影响, 而后对干涉图进行自回归参数建模, 求出自回归模型系数, 代入光谱估计公式得到光谱图。文章采用了两种方法: 修正协方差法 MCOV(modified covariance method)和伯格法(Burg method)求解线型优化最大熵谱估计方法中的自回归模型系数, 通过仿真试验, 将阶次、信噪比对估计光谱的影响做了详尽的比较。研究结果表明, 在线型优化最大熵谱估计方法中, 用修正协方差法求解自回归模型系数要优于伯格法。

**关键词** 傅里叶自退卷积; 自回归模型; 光谱估计; 阶次; 信噪比

**中图分类号:** TH744 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2008)11-2717-04

## 引言

在傅里叶变换光谱学中, 传统的光谱复原算法周期图法(Periodogram)有着其自身无法克服的缺点, 其光谱分辨率主要由干涉仪所能产生的最大光程差决定。在实际条件下, 仪器剪切分光所能产生的最大光程差有限, 特别是对于无动镜的空间调制和时间空间联合调制干涉型成像光谱仪尤为明显, 这导致周期图法得到的光谱分辨率偏低。为了克服这一缺点, 人们提出了光谱分辨率增强(Resolution enhancement)技术, 其实质是应用数字信号处理中的现代谱分析方法, 突破仪器分辨率物理极限而得到高分辨率。目前, 谱估计是傅里叶变换光谱分辨率增强技术主要分支之一<sup>[1-4]</sup>。其中线型优化最大熵谱估计(LOMEE)是谱估计方法中的重要分支, 该方法是将傅里叶自退卷积 FSD、最大熵谱估计 MEM 结合的一种光谱复原技术。在 LOMEE 方法中, 对干涉数据进行自回归参数建模, 求出自回归模型系数是关系到下一步代入光谱估计公式得到光谱图准确性的关键。本文在 LOMEE 方法中, 采用修正协方差法和伯格法两种算法分别求解自回归模型系数。详细研究在这两种求解方法下, 阶次、信噪比对复原光谱的影响, 并对两种求解方法在 LOMEE 方法中的性能做出了比较。

## 1 LOMEE 方法基本原理

### 1.1 傅里叶自退卷积(FSD)

由傅里叶变换光谱学可知, 光谱图与其相应的干涉图是一对傅里叶变换对<sup>[5-8]</sup>。

$$E(\nu) = \int_{-\infty}^{+\infty} I(x) \exp(2\pi\nu x) dx = F^{-1}\{I(x)\} \quad (1)$$

$$I(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} E(\nu) \exp(-i2\pi\nu x) d\nu = F\{E(\nu)\} \quad (2)$$

式中:  $E(\nu)$ 和  $I(x)$ 分别表示为光谱图和干涉图。

假设傅里叶自退卷积的输入光谱  $E(\nu)$ 是由具有线型  $W_0(\nu)$ 的谱线所组成的, 如果希望这些输入谱线在经过傅里叶自退卷积后, 成为具有期望线型  $W(\nu)$ 的输出光谱  $E'(\nu)$ , 则可以采用如下方法,

$$E'(\nu) = F^{-1} \left\{ \frac{F\{W(\nu)\}}{F\{W_0(\nu)\}} F\{E(\nu)\} \right\} \quad (3)$$

式中  $F\{W(\nu)\}$ 为切趾函数。

### 1.2 自回归模型(AR)谱估计

对于一个线性系统  $H(z)$ <sup>[1, 9, 10]</sup>, 输出信号  $x(n)$ 和输入信号  $u(n)$ 之间有如下关系,

$$x(n) = - \sum_{k=1}^p a_k x(n-k) + u(n) \quad (4)$$

收稿日期: 2007-11-29, 修订日期: 2008-03-02

基金项目: 国家自然科学基金项目(60577047)和国家“863”计划项目(863-2006AA122107)资助

作者简介: 高晓峰, 1976年生, 浙江大学现代光学仪器国家重点实验室博士后 e-mail: gaoxf10@126.com

\* 通讯联系人 e-mail: xuzh@zju.edu.cn

$$H(z) = \frac{1}{1 + \sum_{k=1}^p a_k z^{-k}} \quad (5)$$

$$P_x(e^{j\omega}) = \frac{\sigma^2}{\left| 1 + \sum_{k=1}^p a_k e^{-j\omega k} \right|^2} \quad (6)$$

则称其为自回归模型, 其中  $a_k$  为自回归模型系数,  $p$  为模型阶次。

对应于光谱分辨率增强技术中, 光谱估计公式为:

$$E^E(\nu) = \frac{|\sigma|^2}{\left| 1 + \sum_{k=1}^p a_k \exp(i2\pi k \delta x) \right|^2} \quad (7)$$

式中  $\delta x$  为采样间隔,  $\nu$  是波数,  $\sigma^2$  是激励白噪声功率。

将求出的自回归模型系数和激励白噪声功率代入(7)式, 即可得到光谱图, 这称之为谱估计方法。

LOMEE 方法是在假定目标光谱中谱线具有相同的线型和半峰全宽的前提下, 首先利用光谱谱线线型信息对干涉图进行傅里叶自退卷积, 使实际上衰减的干涉信号变为不衰减的干涉信号; 然后对干涉数据进行自回归参数建模, 求出自回归模型系数  $a_k$ ; 代入光谱估计公式得到光谱图。与周期图法相比, LOMEE 方法是外推自相关函数在无限时域中的傅里叶变换, 避免了周期图法将窗函数之外的自相关函数视为零的影响, 从而提高了光谱分辨率<sup>[11]</sup>。

## 2 自回归模型系数的求解算法

### 2.1 伯格法 (Burg)

伯格法<sup>[9]</sup>是较早提出的建立在数据基础之上的 AR 模型系数求解的有效算法。与直接估计 AR 模型系数的修正协方差法相反, 伯格法是先估计反射系数, 通过使前向和后向预测误差功率的平均值为极小的方法来得到反射系数, 然后利用列文森 (Levinson) 递推得到自回归模型系数  $a_k$  的估计值。

### 2.2 修正协方差法 (MCOV)

与伯格法不同的是, 修正协方差法<sup>[9]</sup>令前向和后向预测误差功率估计的平均值  $\hat{\rho}$  相对于其所对应阶次的每一自回归模型系数为最小, 得到修正协方差方程。解之, 直接得到自回归模型系数和最小预测误差功率。

## 3 仿真实验

采用两种方法: 修正协方差法 MCOV 和伯格法 Burg 求解 LOMEE 方法中的自回归模型系数, 比较阶次、信噪比对仿真结果的影响。

实际光谱谱线都是具有一定线宽和线型的, 并且相近谱线会发生混叠。为便于仿真实验, 实验中采用的是一个模拟的无噪声、无线型的理论上的理想光谱。

其傅里叶变换后所产生的干涉图可表示为:

$$I_n = \sum_{i=1}^6 A_i \cos(2\pi\nu_i x_n) \quad (8)$$

其中  $\nu_1 = 150 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\nu_2 = 300 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\nu_3 = 400 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\nu_4 = 500 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\nu_5 = 550 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\nu_6 = 600 \text{ cm}^{-1}$ ,  $A_1 = A_3 = A_5 = 1$ ,  $A_2 =$

$A_4 = A_6 = 2$ 。

如果光谱谱线是半峰全宽为  $2\sigma_0$  的 Lorentzian 线型, 且在干涉图的获取中带有附加噪声  $\omega_n$ , 并假设  $\omega_n$  为高斯白噪声, 则干涉图可表示为:

$$I_n = \exp(-2\pi\sigma_0 x_n) \sum_{i=1}^6 A_i \cos(2\pi\nu_i x_n) + \omega_n \quad (9)$$

仿真实验中均设定干涉图采样间隔为  $\delta x = 0.000\ 031\ 25 \text{ cm}$ , 采样数据点数为  $N = 101$ , 则傅里叶变换光谱的光谱范围为  $\Delta\nu = \frac{1}{2\delta x} = 16\ 000 \text{ cm}^{-1}$ 。

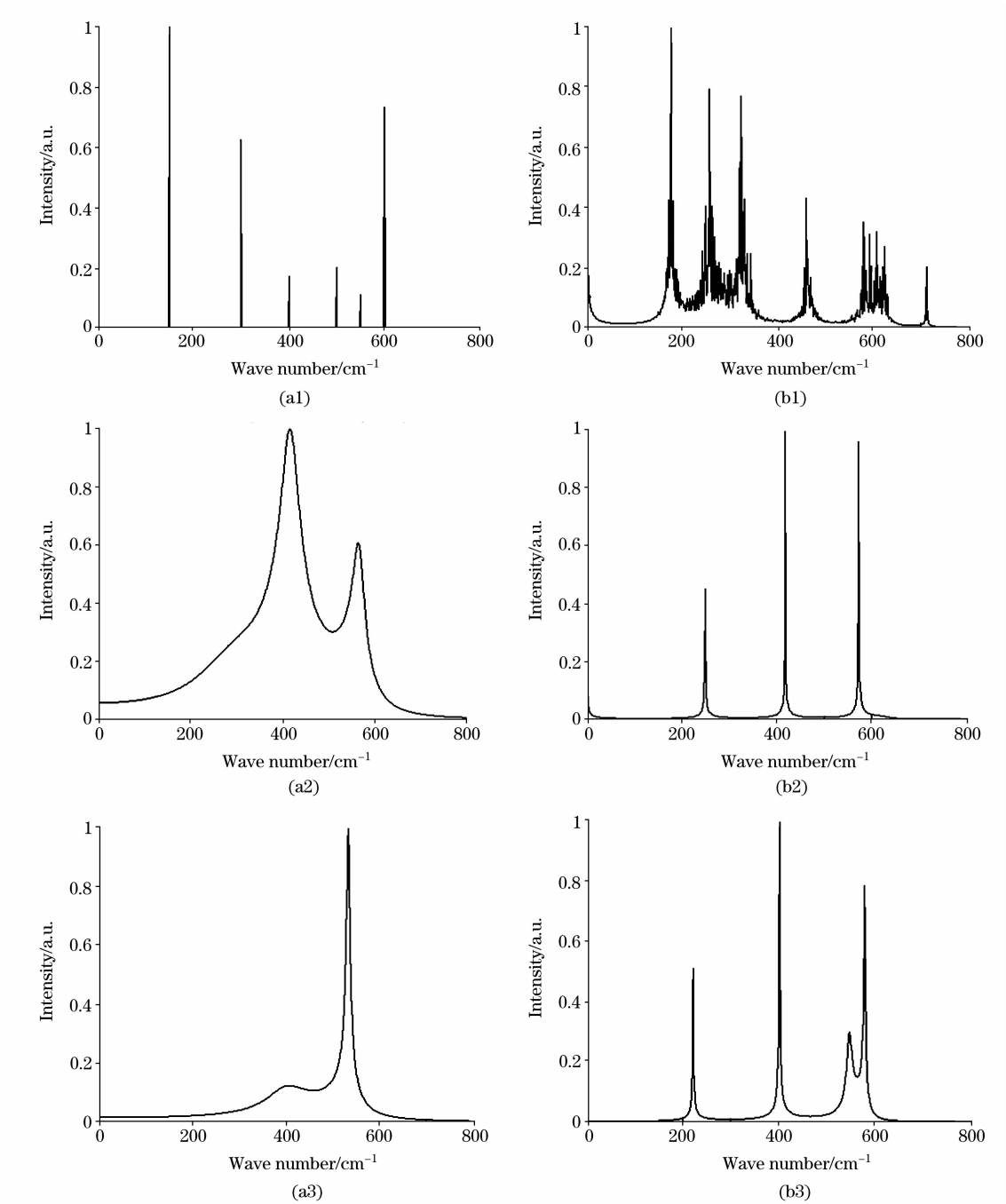
对于 LOMEE 方法, 模型阶次、噪声的变化都会对自回归模型系数的求解带来影响。下面将通过模型阶次、噪声, 对修正协方差法 (MCOV) 和伯格法 (Burg) 在 LOMEE 方法中的性能作出比较。

图 1 中 (a), (b) 六个图分别表示在退卷积系数  $\sigma_{\text{FSD}} = 20 \text{ cm}^{-1}$  时, 在假定完全退卷积条件下即输入光谱谱线半峰全宽  $2\sigma_0 = 40 \text{ cm}^{-1}$ , 干涉图信噪比  $\text{SNR} = \infty, 10\ 000, 1\ 000$  时, 采用修正协方差法 (MCOV) 和伯格法 (Burg) 得到的 LOMEE 方法的光谱图。LOMEE 方法中不同求解方法在不同条件下有着各自不同的最佳阶次, 最佳阶次的判定由品质因子确定<sup>[12]</sup>。

在线型优化最大熵谱估计方法 (LOMEE) 中, 自回归模型系数的求解起着至关重要的作用。线型优化最大熵谱估计方法存在着峰高比失真的缺点, 可采用强度修正<sup>[11,13]</sup>来弥补, 只要得到的谱线位置准确, 经过强度修正便可得到真实的峰高比。图 1 中均未作强度修正。可以看出无噪声时, 修正协方差法 (MCOV) 得到的光谱图最好。LOMEE 方法的核心是准确求解自回归模型, 将最佳自回归模型系数直接代入光谱估计公式得到分辨率增强光谱。自回归模型谱估计的分辨率对附加在信号上的观测噪声敏感, 信噪比  $\text{SNR}$  越小, 分辨率降低越明显。当信噪比  $\text{SNR}$  确定时, 自回归模型谱估计的分辨率可通过增大模型阶次的方法来改善, 然而这容易导致谱线分裂, 产生伪峰。图 1 中 (a) 和 (b) 系列图证实了这一点, 当有附加噪声存在时, 不论求解方法如何, 光谱分辨率都明显下降。附加噪声越大, 光谱分辨率越低。相比较而言, 伯格法 (Burg) 的抗噪声能力稍强。

## 4 结论

在线型优化最大熵谱估计方法 (LOMEE) 中自回归模型两种求解方法中, 对于正弦信号, 修正协方差法 (MCOV) 产生的光谱图最好, 其谱线位置准确。但是线型优化最大熵谱估计方法对于噪声很敏感, 受到噪声水平的限制, 其所能实现的分辨率有限。伯格法 (Burg) 抗噪声能力稍强。光谱分辨率增强技术是通过信号处理方法对测量光谱进行处理, 以提取那些不能被仪器分辨的光谱信息。在研究有关复杂物质结构或微弱相互作用的光谱中, 分辨率增强技术往往是必要的和有效的手段。LOMEE 方法对于分子的发射光谱和吸收光谱更为有效。



**Fig. 1 Comparison of MCOV and Burg method in LOMEE under different noise level**

(a1): MCOV(SNR= $\infty$ ,  $p=51$ ); (a2): MCOV(SNR=10 000,  $p=48$ ); (a3): MCOV(SNR=1 000,  $p=41$ );  
 (b1): Burg(SNR= $\infty$ ,  $p=100$ ); (b2): Burg(SNR=10 000,  $p=98$ ); (b3): Burg(SNR=1 000,  $p=100$ )

## 参 考 文 献

- [ 1 ] Kauppinen J K, Moffatt D J, Hollberg M R, et al. *Applied Spectroscopy*, 1991, 45(3): 411.
- [ 2 ] GAO Xiao-feng, XIANG Li-bin(高晓峰, 相里斌), *Acta Photonica Sinica(光子学报)*, 2007, 36(3): 481.
- [ 3 ] DONG Ying, XIANG Li-bin, ZHAO Bao-chang(董 瑛, 相里斌, 赵葆常). *Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析)*, 2003, 23(3): 441.
- [ 4 ] Kawata S, Minami K, Minami S. *Applied Optics*, 1983, 22(22): 3593.
- [ 5 ] Kauppinen J K, Moffatt D J, Mantsch H H, et al. *Applied Spectroscopy*, 1981, 35(3): 271.
- [ 6 ] Kauppinen J K, Moffatt D J, Cameron D G, et al. *Applied Optics*, 1981, 20(10): 1866.
- [ 7 ] DONG Ying, XIANG Li-bin, ZHAO Bao-chang(董 瑛, 相里斌, 赵葆常). *Acta Photonica Sinica(光子学报)*, 2002, 31(7): 841.
- [ 8 ] GAO Xiao-feng, XIANG Li-bin(高晓峰, 相里斌). *Acta Photonica Sinica(光子学报)*, 2006, 35(11): 1713.
- [ 9 ] Kay S M. *Modern Spectral Estimation*. Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall, Inc. 1987.
- [10] Kauppinen J K, Partanen J. *Fourier Transforms in Spectroscopy*. Weinheim, Germany: Wiley-VCH Verlag GmbH, 2001. 239.
- [11] XIANG Li-bin, ZHAO Bao-chang, XUE Ming-qiu(相里斌, 赵葆常, 薛鸣球). *Acta Optica Sinica(光学学报)*, 1995, 15(11): 1529.
- [12] GAO Xiao-feng, XIANG Li-bin(高晓峰, 相里斌). *Acta Photonica Sinica(光子学报)*, 2007, 36(6): 1133.
- [13] XIANG Li-bin, ZHAO Bao-chang, XUE Ming-qiu(相里斌, 赵葆常, 薛鸣球). *Acta Optica Sinica(光学学报)*, 1996, 16(4): 430.

## Comparison of Two Methods to Solve AR Model Parameters of Line Shape Optimized Maximum Entropy Spectral Estimation

GAO Xiao-feng, XU Zhi-hai\*

State Key Laboratory of Modern Optical Instrumentation, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China

**Abstract** Line shape optimized maximum entropy spectral estimation (LOMEE) is to remove the influence resulting from line shape by Fourier self-deconvolution and to model interferogram data in order to substitute AR model parameters for the spectral estimator. The proper calculation of AR model parameters in LOMEE is very important to the quality of recovered spectrum. Modified covariance method (MCOV) and Burg method were used to solve AR model parameters under different noise level. The simulation results of recovered spectrum were acquired with the two methods. The influences of AR order and signal-to-noise ratio on the simulation were compared. It is shown that MCOV is more excellent than Burg in LOMEE.

**Keywords** Fourier self-deconvolution; Autoregressive model; Spectral estimator; AR model order; Signal-to-noise ratio

(Received Nov. 29, 2007; accepted Mar. 2, 2008)

\* Corresponding author